

Лаборатория квантовой химии и спектроскопии

(Ивановский А.Л./Кузнецов М.В.)

(ноябрь 2012 – ноябрь 2013)

МОНОГРАФИИ

ОБЗОРЫ

1. **А.Л. Ивановский.** “Поиск сверхтвердого углерода: между графитом и алмазом” // **Сверхтвердые материалы**, № 1, с. 2-20 (2013)
2. **A.L. Ivanovskii.** “Pt-based and Pt-doped layered superconducting materials: synthesis, properties, and simulation” // **Platinum Metals Rev.**, V. 57, No. 2, P. 87-100 (2013)
3. **A.L. Ivanovskii.** “Graphynes and graphdyines” // **Progress in Solid State Chem.** V. 41, P. 1-19 (2013)
4. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “Novel graphene-like nanocarbides and nanonitrides of d metals (MXenes): synthesis, properties and simulation” // **Micro & Nano Letters**, V.8, No. 2, pp. 59-62 (2013) Ф.Л.
5. **А.Л. Ивановский, А.Н. Еняшин.** “Графеноподобные нано-карбиды и нано-нитриды переходных металлов” // **Успехи химии**, Т. 82, № 8, С. 735-744 (2013)
6. **М.В. Кузнецов, И.И. Огородников, А.С. Ворох.** Рентгеновская фотоэлектронная дифракция и фотоэлектронная голограмия как методы исследования локальной атомной структуры поверхности твердых тел. Обзор. // **Успехи химии**, Т.83, №1, С.13-37 (2014).

СТАТЬИ В ЗАРУБЕЖНЫХ ЖУРНАЛАХ

1. **A.L. Ivanovskii.** “Hardness of hexagonal AlB₂-like diborides of s, p and d metals from semi-empirical estimations” // **Int. J. Refractory Metals Hard Mater.** V. 36, P. 179-182 (2013)
2. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “First-principles calculations of elastic and electronic properties of tetragonal Th₂NiC₂ as a parent phase for new superconductors” // **J. Alloys Comp.**, V. 551, P. 338-342 (2013)
3. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “Structural, elastic, and electronic properties of new 211 MAX phase Nb₂GeC from first-principles calculations” // **Physica B**, V. 410, P. 42-48 (2013)
4. **D.V. Suetin, A.L. Ivanovskii.** “Comparative study of electronic structure of cubic and hexagonal phases of Re₃W as non-centrosymmetric and centrosymmetric low-T_C superconductors” // **Intermetallics**, V. 34, P. 101-105 (2013).
5. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii.** “Electronic band structure and Fermi surface of tetragonal low-temperature superconductor Bi₂Pd as predicted from first principles” // **J. Supercond. Novel Magnet.** V.26, No 1, P. 1-4 (2013)
6. **A.N. Enyashin, A.L. Ivanovskii.** “Fluorographynes: Stability, Structural and Electronic Properties” // **Superlatt. Microstruct.**, V. 55, P. 75-82 (2013).
7. V.D. Zhuravlev, V.G. Bamburov, A.R. Beketov, **L.A. Perelyaeva, I.V. Baklanova**, O.V. Sivtsova, V.G. Vasil'ev, E.V. Vladimirova, V.G. Shevchenko, I.G. Grigorov. “Solution Combustion Synthesis of α-Alumina Using Urea” // **Ceramics International**, V. 39, P. 1379-1384 (2013).
8. **N. I. Medvedeva**, A. S. Murthy, V. L. Richards, D. C. Van Aken, J. E. Medvedeva. ”First principle study of cobalt impurity in bcc Fe with Cu precipitates” // **J. Mater. Sci.** V. 48, P. 1377–1386 (2013).
9. Oshtrakh, M.I., Ushakov, M.V., **Semenova, A.S., Kellerman, D.G.**, Sepelak, V., Rodriguez, A.F.R., Semionkin, V.A., Morais, P.C. “Magnetite nanoparticles as-prepared and dispersed in Copaiba oil: study using magnetic measurements and Mossbauer spectroscopy”. // **Hyperfine Interact.**, 2012 DOI: 10.1007/s10751-012-0666-8
10. **A.N. Enyashin**, G. Seifert. “Density-functional study of Li_xMoS₂ intercalates ($0 \leq x \leq 1$)” // **Comput. Theor. Chem. (formerly J. Mol. Structure: THEOCHEM)**, V. 999, P. 13-20 (2012).

11. D. Stroppa, R. Rosentsveig, R. Ron, L. Yadgarov, **A.N. Enyashin**, R. Tenne, L. Houben. “Investigation of rhenium doped MoS₂ nanoparticles with fullerene-like structure (IF-MoS₂)” // **ZAAC - Zeitschrift für Anorganische und Allgemeine Chemie**, V. 638, P. 2610-2616 (2012).
12. L. Houben, **A.N. Enyashin**, Y. Feldman, R. Rosentsveig, D. Stroppa, M. Bar-Sadan. “Diffraction from Disordered Stacking Sequences in MoS₂ and WS₂ Fullerenes and Nanotubes” // **J. Phys. Chem. C**, V. 116, P. 24350-24357 (2012).
13. **V.V. Bannikov, A.L. Ivanovskii** “Trends in structural, electronic properties, Fermi surface topology, and inter-atomic bonding in the series of ternary layered dichalcogenides KNi₂S₂, KNi₂Se₂, and KNi₂Te₂ from first principles calculations” // **Physica B**, V. 418, P. 76–80 (2013).
14. **D.V. Suetin, A.L. Ivanovskii**. “Structural, electronic properties, and chemical bonding in quaternary layered titanium pnictide-oxides Na₂Ti₂Pn₂O and BaTi₂Pn₂O (Pn=As, Sb) from FLAPW-GGA calculations” // **J. Alloys Comp.**, V. 564, P. 117–124 (2013).
15. N.I. Kadyrova, **N.I. Medvedeva**, Yu.G. Zainulin, **A.L. Ivanovskii**. “Multi-component perovskite-type oxides CaCu₃V_{4-x}Mn_xO₁₂: synthesis and electronic properties” // **Solid State Commun.**, V. 162, P.57-60 (2013)
16. **D.V. Suetin, I.R. Shein, A.L. Ivanovskii**. “The effect of arsenic vacancies on the electronic and magnetic properties of LaFeAs_{1-x}O”// **J. Magnetism Magnetic Materials** V. 335, P. 21-27 (2013).
17. **A.N. Enyashin**, M. Bar-Sadan, L. Houben, G. Seifert. “Line Defects in Molybdenum Disulfide Layers” // **J. Phys. Chem. C**, V. 117, P. 10842-10848 (2013).
18. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii**. “Ab initio probing of magnetic and electronic properties of monoclinic ε -WO₃ doped with 3d transition metals within GGA and GGA+U” // **J. Supercond. Novel Magnet.** V. 26, P. 2343–2346 (2013).
19. P. Wagner, **V.V. Ivanovskaya**, M.J. Rayson, P.R. Briddon, C.P. Ewels. “Mechanical properties of nanosheets and nanotubes investigated using a new geometry independent volume definition” // **J. Phys.: Cond. Matter**, V. 25 Iss. 15, art. 155302 (2013).
20. **V.V. Bannikov, A.L. Ivanovskii** “Effect of cation deficiency on the electronic properties and Fermi surface topology of superconducting K_{1-x}Ni_{2-y}Se₂” // **Physica C**, V. 492, P. 44-48 (2013)
21. **A.N. Enyashin, A.L. Ivanovskii**. “Layers and tubes of fluorographene C₄F: stability, structural and electronic properties from DFTB calculations” // **Chem. Phys. Lett.**, V. 576, P. 44-48 (2013)
22. **I. R. Shein**, S. L Skornyakov, V. I Anisimov, **A.L. Ivanovskii**. “Structural, elastic and electronic properties of new layered superconductor HfCuGe₂ in comparison with isostructural HfCuSi₂, ZrCuGe₂, and ZrCuSi₂ from first-principles calculations” // **Intermetallics**, V.42, P. 130-136 (2013)
23. **A.N. Enyashin, A.L. Ivanovskii**. “Structural, electronic properties and stability of MXenes Ti₂C and Ti₃C₂ functionalized by methoxy groups” // **J. Phys. Chem. C**, V. 117, P. 13637–13643 (2013).
24. **Ryzhkov M.V.**, Delley B.T. “Electronic structure of predicted endohedral fullerenes An@C₄₀ (An = Th – Md)” // **Comput. Theor. Chem.**, V. 1013, P. 70-77 (2013).
25. Tobin J.G., Yu S.-W., Chung B.W., **Ryzhkov M.V.**, Mirmelstein A. “Direct comparison of spectroscopic data with cluster calculations of plutonium dioxide and uranium dioxide” // **J. Vacuum Science and Technology. A**, V. 31, P. 013001-3 (2013).
26. Teterin Yu.A., Maslakov K.I., Teterin A.Yu., Ivanov K.E., **Ryzhkov M.V.**, Petrov V.G., Enina D.A., Kalmykov S.N. “Electronic structure and chemical bonding in PuO₂” // **Phys. Rev. B**, V. 87, P. 245108-13 (2013).
27. **Ryzhkov M.V.**, Mirmelstein A., Yu S.-W., Chung B.W., Tobin J.G. “Probing actinide electronic structure through Pu cluster calculations” // **Int. J. Quant. Chem.**, V. 113, P.1957-1965 (2013).
28. **V.V. Bannikov, A.L. Ivanovskii** “Elastic and electronic properties of antiperovskite-type Pd- and Pt-based ternary carbides from first-principles calculations” // **J. Alloys Comp.**, V. 577, P. 615-621 (2013)
29. **A.N. Enyashin, A.L. Ivanovskii**. “Structural, electronic, and elastic properties of Y-diamonds and their BN analogues” // **Diamond Relat. Mater.**, V. 38, P. 93-100 (2013).
30. **И.В. Бакланова**, В.Н. Красильников, **Л.А. Переляева**, О.И. Гырдасова. “Люминесцентные свойства формиата и оксида цинка, донированных европием” // **Теор. эксперим. химия**, Т. 49, № 4, С. 222-227 (2013).
31. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii**. “Elastic, electronic properties and intra-atomic bonding in orthorhombic and tetragonal polymorphs of BaZn₂As₂ from first-principles calculations” // **J. Alloys Comp.**, V. 583,

P. 100-105 (2014)

32. I.R. Shein, A.L. Ivanovskii. "Mechanical properties of new Pt-based superconductors CaPt₃P and SrPt₃P as evaluated from first-principles calculations" // **J. Supercond. Novel Magnet.** V. 26, No. 11, P. 3167-3170 (2013).
33. A.N. Enyashin, A.L. Ivanovskii. "Two-dimensional titanium carbonitrides and their hydroxylated derivatives: Structural, electronic properties and stability of MXenes Ti₃C_{2-x}N_x(OH)₂ from DFTB calculations" // **J. Solid State Chem.**, V. 207, P. 42-48 (2013).
34. M. C. McGrath; D. C. Van Aken; N. I. Medvedeva; J. E. Medvedeva, "Work Hardening Behavior in Steel with Multiple TRIP Mechanisms", **Metallurgical and Materials Transactions A**, V.44, P.4634-4643 (2013).
35. P. Wagner, V.V. Ivanovskaya, B. Humbert, J.J. Adjizian, P.R. Briddon, C.P. Ewels. "Stable hydrogenated graphene edge types: Normal and reconstructed Klein edges" // **Phys. Rev. B** 88, 094106 (2013)
36. Ya.V. Baklanova, I.Yu. Arapova, A.L. Buzlukov, A.P. Gerashenko, S.V. Verkhovskii, K.N. Mikhalev, T.A. Denisova, I.R. Shein, L.G. Maksimova. "Localization of vacancies and mobility of lithium ions in Li₂ZrO₃ as obtained by ^{6,7}Li NMR" // **Journal of Solid State Chemistry**. V. 208. P. 43-49 (2013)
37. E.Y. Konyshева, M.V. Kuznetsov. Fluctuation of surface composition and chemical states at the hetero-interface in composites comprised of a phase with perovskite structure and a phase related to the Ruddlesden-Popper family of compounds. // **RSC Adv.** 3, 14114–14122 (2013).
38. M.V.Yablonskikh, A.S.Shkvarin, Yu.M.Yarmoshenko, A.I.Merentsov, M.V.Kuznetsov, A.N.Titov. Observing of Ti, Cr and Mn 2p-3d resonance in valence band of titanium dichalcogenides. // **Journal of Physics: Conference Series**. 425, 102004 (2013).
39. M.V. Kuznetsov, G.S. Zakharova, Synthesis and XPS study of nanoscale oxidesMxTi0.91V0.09O2+δ•nH2O (M = Co, Fe). // Mendeleev Commun., 2013 (in press).
40. M.G. Kostenko, A.V. Lukoyanov, V.P. Zhukov, A.A. Rempel. "Vacancies in ordered and disordered titanium monoxide: Mechanism of B1 structure stabilization" // **Journal of Solid State Chemistry**, V. 204. P. 146 (2013).
41. N.V. Tarakina, A.P. Tyutyunnik, Ya.V. Baklanova, L.G. Maksimova, T.A. Denisova, R.B. Neder Crystal structure of a new HfO(OH)₂ oxyhydroxide // **Powder Diffraction**. – 2013 Vol.28, issue S2, p. 510.
42. N. I. Medvedeva, A.L. Ivanovskii. "First-principles study of structural, elastic, and electronic properties of M₂₃C₆ and MC carbides (M = Ru, Rh, Pd, Os, Ir, and Pt)"// **Phys. Status Solidi B**, 1-7 (2013)/DOI10.1002/pssb.201349062
43. А.С. Семенова, Д.Г. Келлерман Особенности термического разложения метастабильных кобальтитов лития". Теор. эксперим. химия, т.48, № 6, С.349-353 (2012) не вошел в 2012
44. D. Kellerman, N. Medvedeva, N. Mukhina, A. Semenova, I. Baklanova, L. Perelyaeva, V. Gorshkov. Vanadium doping of LiMnPO₄: vibrational spectroscopy and first-principle studies. **Chemical Physics Letters** DOI 10.1016/j.cplett.2013.10.087
45. S. V. Ovsyannikov , Y.G. Zainulin, N. I. Kadyrova, A. P. Tyutyunnik , A. S. Semenova, D. Kasinathan, A. A. Tsirlin, N. Miyajima, A. E. Karkin New Antiferromagnetic Perovskite CaCo₃V₄O₁₂ Prepared at High-Pressure and High-Temperature Conditions **Inorg. Chem.**, 2013, 52 (20), pp 11703–11710
46. A.A. Markov, E.V. Shalaeva, A.P. Tyutyunnik, V.V. Kuchin, M.V. Patrakeev, I.A. Leonidov, V.L.Kozhevnikov, "Structural features and enhanced high-temperature oxygen ion transport in SrFe_{1-x}Ta_xO_{3-□}"// **J.S.S.Chem.** 197 (2013) p.191-197.
47. M.V. Patrakeev, AA. Markov, E.V. Shalaeva, A/P/ Tyutynnik, E.V. Tsipis, J.C. Waerenborgh, V.V. Knarton, I.A. Leonidov, V.L. Lozhevnikov, "Phase separation-promoted ion conduction in SrFe_{0.67}Ta_{0.33}O_{3-□}"// **Solid State Ionics** 244 (2013) p.17-22.
48. V.P. Zhukov, I.R. Shein, V.M. Zainullina "Electronic band structure, optical absorption and photocatalytic activity of anatase doped with bismuth or carbon// **JOURNAL OF ALLOYS AND COMPOUNDS**, v. 548, pp. 46-51 (2013).

СТАТЬИ В ОТЕЧЕСТВЕННЫХ ЖУРНАЛАХ

1. Шеин И.Р., Ивановский А.Л. “Electronic band structure and Fermi surface for new layered superconductor LaO_{0.5}F_{0.5}BiS₂ in comparison with parent phase LaOBiS₂ from first principles” // Письма в ЖЭТФ, т. 96, № 12, с. 895-864 (2012).
2. Енишин А.Н., Ивановский А.Л. “О возможностях метода рентгеновской дифракции в определении политипов вnanoструктурированных слоистых дисульфидах металлов” // Ж. структ. химии, Т. 54, № 2, с. 336-343 (2013).
3. И.В. Бакланова, В.Н. Красильников, Л.А. Переляева, О.И. Гырдасова. “Получение, морфология и люминесцентные свойства нанодисперсного сесквиоксида скандия, допированного европием” // Ж. неорган. химии, Т. 57, № 12, С. 1627–1633 (2012) декабрь.
4. В.Н. Красильников, О.И. Гырдасова, И.В. Бакланова, Л.Ю. Булдакова, М.Ю. Янченко, Р.Ф. Самигуллина, О.В. Корякова. “Гликолят Ti_{1-x}Fe_x(OCH₂CH₂O)_{2-x/2} как прекурсор для получения квазиодномерных (1-D) твердых растворов Ti_{1-x}Fe_xO_{2-2x/2} (0≤x≤0.1)” // Ж. неорган. химии, Т. 58, № 2, С. 154-160 (2013).
5. В.Н. Красильников, А.П. Тютюнник, Л.А. Переляева, И.В. Бакланова. “Синтез, кристаллическая структура и колебательные спектры MVO(SO₄)₂ (M = Rb, Cs, Tl)” // Ж. неорган. химии, Т. 58, № 2, С. 161-167 (2013).
6. Н.И.Медведева. “Влияние примесей бора, азота, кислорода на электронную структуру и деформационное поведение Ti₃SiC₂”// Физика твердого тела, Т.55, №3, с. 500-503 (2013).
7. В.В. Месилов, В.Р. Галахов, Б.А. Гижевский, А.С. Семенова, Д.Г. Келлерман, М. Raekers, М. Neumann. “Зарядовые состояния ионов кобальта в nanostructured кобальтиде лития: рентгеновские абсорбционные и фотоэлектронные спектры”. // Физика твердого тела, т. 55, №. 5, 866-871 (2013).
8. Д.В. Сутина, А.Л. Ивановский “Electronic properties and Fermi surface for new Fe-free layered pnictide-oxide superconductor BaTi₂Bi₂O from first principles” // Письма в ЖЭТФ, Т. 97, № 4, С. 248-252 (2013).
9. С.С. Туленин, В.Ф. Марков, Л.Н. Мaskaева, М.В. Кузнецов. Гидрохимическое осаждение и исследование тонких пленок в системе Cu₂S-In₂S₃. // Бутлеровские сообщения. 2013, Том 31. №1-3, С.97-103.
- 10.С.С. Зырянов, А.В. Кружалов, Ф.Г. Нешов, О.В. Рябухин, М.В. Кузнецов. Исследование поверхности стали, облученной протонами в иодной среде. // Поверхность. Рентгеновские, Синхротронные и нейтронные исследования, 2013, №4, с.1-7.
- 11.В.Н. Красильников, В.П. Жуков, Л.А. Переляева, И.В. Бакланова, И.Р. Шеин. “Электронная зонная структура, оптическое поглощение и фотокаталитическая активность допированного железом анатаза” // Физика твердого тела, Т. 55, № 9, С. 1788-1796 (2013).
- 12.Шеин И.Р., А.Н. Енишин, Ивановский А.Л. “Структурные, электронные, механические, магнитные свойства и относительная стабильность полиморфных модификаций ReN₂ по данным первопринципных расчетов”// Физика твердого тела, Т. 55, № 9, с. 1709-1713 (2013).
- 13.Шеин И.Р., Ивановский А.Л. “Влияние примесей фтора, азота и углерода на электронные и магнитные свойства WO₃” // Физ. техника полупроводников, Т. 47, № 6, с. 732-736 (2013).
- 14.О.И. Гырдасова, И.В. Бакланова, М.А. Мелкозерова, В.Н. Красильников, В.Г. Бамбуров. “Синтез, оптические свойства и дефектная структура диоксида титана допированного углеродом” // ДАН, Т. 452, № 1, С. 42-46 (2013).
- 15.Н.А.Журавлев, М.В.Ротермель, Т.И. Красненко, Р.Ф.Самигуллина “ЯМР ⁵¹V в твердых растворах Mn_{2-2x}Ni_{2x}V₂O₇” // Журнал структурной химии. 2013. Т.54. С.128-131.
- 16.Баников В.В., Ивановский А.Л. “Electronic and magnetic properties of new 2D diluted magnetic semiconductor La_{1-x}Ba_xZn_{1-x}Mn_xAsO from first-principles calculations”// Письма в ЖЭТФ, Т. 98, № 7, с. 448-451 (2013)
- 17.С.Л. Скорняков, И.Р. Шеин, А.Л. Ивановский, В.И. Анисимов. “Correlated band structure of superconducting NdFeAsO_{0.9}F_{0.1}: dynamical mean-field study” // Письма ЖЭТФ, Т. 98, № 7, с. 427-431 (2013)
- 18.Я.В. Бакланова, И.Ю. Арапова, И.Р. Шеин, Л.Г. Максимова, К.Н. Михалев, Т.А. Денисова. “Зарядовое распределение и подвижность ионов лития в Li₂TiO₃ по данным ЯМР ^{6,7}Li” // Журнал

- структурной химии.** Т. 54. С. 113-120 (2013)
19. **Ya.V. Baklanova**, A.V. Ishchenko, **T.A. Denisova**, L.G. Maksimova, B.V. Shulgin, V.V. Yagodin. “Thermoluminescence properties of lithium hafnate” // **Известия Высших учебных заведений. Физика.** Т. 55, № 11. Р. 18-20 (2012) (не вошел в 2012)
20. Красненко Т.И., **Журавлëв Н.А.**, Ротермель М.В. Стабилизация триклиновой структуры $Mn_2V_2O_7$ путём изовалентного катионного замещения // **Известия РАН. Серия Физическая.** 2013. Т. 77. № 3. С. 278-280.
21. Выходец В.Б., Куренных Т.Е., Ермаков А.Е., Бекетов И.В., Багаев А.В., Гавико В.С., **Кузнецов М.В.**, Медведев А.И., Уймин М.А., Шабанова К.И., Щеголева Н.Н. Кристаллическая структура и химический состав нанопорошков оксида титана. // **Российские нанотехнологии.** Т.8, №7-8, 57-61 (2013).
22. С.С. Туленин, В.Ф. Марков, Л.Н. Маскаева, **М.В. Кузнецов**. Гидрохимическое осаждение и исследование тонких пленок в системе $Cu_2S-In_2S_3$. // **Бутлеровские сообщения**, Том 31. №1-3, С.97-103 (2013).
23. L.V. Zolotukhina, **M.V. Kuznetsov**, B.R. Gel'chinskii, S.V. Zhidovinova, I.G. Aref'ev, Investigating the Surface of Particles of Ultradispersed Copper Powders Obtained by Gas_Phase Condensation. // **Russian Journal of Non-Ferrous Metals**, Vol. 54, No. 1, pp. 85–92 (2013).
24. В.Г.Шевченко, **М.В.Кузнецов**, А.В.Конюкова, И.А.Чупова, И.Н.Латош, С.А.Бибанаева, Д.А.Еселеевич. Поверхностная активность бария и ее влияние на реакционную способность порошка на основе алюминия. // **Физикохимия поверхности и защита материалов**, Том. 49, №6, С. 649-653 (2013).
25. A.S.Kamenetskikh, N.V.Gavrilov, **M.V.Kuznetsov**, A.V. Chukin, L.V. Shishkina. Investigation of TiC/a-C:H coatings prepared by reactive magnetron sputtering in nonself-sustained plasma catode discharge.// **Известия высших учебных заведений. Физика.** Т.55, №12/2 141-144 (2013).
26. С.В.Сударева, **М.В.Кузнецов**, Т.П.Криницына, Е.И.Кузнецова, Ю.В.Блинова, Е.П.Романов, Д.Н.Раков, Ю.Н.Белотелова, Т.Е.Куренных. Волны смещений кислородных атомов в решетке фазы $Bi_2Pb-2223$ композита, отожженного в атмосфере с пониженным содержанием кислорода (O_2+N_2). // **Физика твёрдого тела.** 54, С. 235-240 (2012). (не вошел в 2012)
27. Ю.В. Блинова, **М.В. Кузнецов**, В.Р. Галахов, С.В. Сударева, Т.П. Криницына, Е.И. Кузнецова, М.В. Дегтярев, О.В. Снигирев, Н.В. Порохов. Рентгеновские фотоэлектронные спектры и состав пленок $YBa_2Cu_3O_7-\delta$, полученных методом лазерной абляции. // **ФТТ**, 2014 (в печати).
28. В.М. Зайнуллина, **В.П. Жуков**. “Электронная структура и оптические свойства анатаза, легированного висмутом и углеродом” // **Физика твердого тела.** Т. 55, № 3, с. 534 (2013).
29. **В.П. Жуков**, E.V. Chulkov. “Динамика процессов электрон-дырочной рекомбинации и захвата носителей в анатазе, легированном бором, углеродом или азотом” // **Физика твердого тела.** Т. 55, № 9, с. 1697 (2013).
30. А. А. Комлев, **А. С. Семенова**. Магнитные характеристики $MgFe_2O_4$ -содержащих нанопорошков, полученных гидротермальным методом. Наносистемы: физика, химия, математика, 2012, 3 (6), С. 105-111
31. **Е.В. Шалаева**, Ю.В. Чернышев, Е.О. Смирнова, С.В. Смирнов, Ламельная структура и наномеханические свойства квазикристаллических сплавов Al-Cu-Fe // **ФТТ 55** (2013) с. 2095-2104.
32. М.А. Мелкозерова, В.Н. Красильников, О.И. Гырдасова, **Е.В. Шалаева**, И.В. Бакланова, Л.Ю. Булдакова, М.Ю. Янченко, Влияние легирования 3d-элементами (Co,Ni,Cu) на собственную дефектную структуру и фотокаталитические свойства наноструктурированного ZnO с трубчатой морфологией агрегатов // **ФТТ 55** (2013) 2340-2345.
33. **Шеин И.Р., Ивановский А.Л.** “Electronic band structure, Fermi surface, structural and elastic properties of two polymorphs of $MgFeSeO$ as possible new superconducting systems” // **Письма ЖЭТФ**, Т. 98, № 10, с.682-686.
34. **А.Л. Ивановский**. “Микротвердость полиморфных форм карбидов и нитридов гафния и тантала” // **Материаловедение**, № 2, с. 3-6 (2013)
- 35.

ПАТЕНТЫ

1. Марков В.Ф., Туленин С.С., Маскаева Л.Н, **Кузнецов М.В.** Раствор для гидрохимического осаждения полупроводниковых пленок сульфида индия. Федеральная служба по интеллектуальной собственности, **патентам** и товарным знакам, № 2013132671 от 15.07.13.

НЕРЕЦЕНЗИРУЕМЫЕ ИЗДАНИЯ (ЭЛ. ПРЕПРИНТЫ, СБОРНИКИ И Т.Д.)

1. **D.V. Suetin, A.L. Ivanovskii** “Electronic properties and Fermi surface for new Fe-free layered superconductor BaTi₂Bi₂O from first principles”//**arXiv:**1302.0108 (2013).
2. **V.V. Bannikov, A.L. Ivanovskii** “Trends in structural, electronic properties, Fermi surface topology, and intra-atomic bonding in the series of ternary layered dichalcogenides KNi₂S₂, KNi₂Se₂, and KNi₂Te₂ from first principles calculations” // **arXiv:**1302.1661 (2013).
3. Т.И. Красненко, М.В.Ротермель, **Н.А.Журавлев**, Л.Л.Соколова “Черный пигмент, отражающий тепло. Невозможное возможно” // Промышленные покрытия, №1-2, 2013, с.68-71.
4. **A.N. Enyashin, A.L. Ivanovskii** “2D titanium carbonitrides and their hydroxylated derivatives: Structural, electronic properties and stability of MXenes Ti₃C_{2-x}N_x and Ti₃C_{2-x}N_x(OH)₂” // **arXiv:** 1304.1673 (2013)
5. **A.N. Enyashin, A.L. Ivanovskii** “Structural, electronic properties and stability of MXenes Ti₂C and Ti₃C₂ functionalized by methoxy groups” // **arXiv:** 1304.1670 (2013)
6. **A.N. Enyashin**, M. Bar-Sadan, L. Houben, G. Seifert “Line Defects in Molybdenum Disulfide Layers” // **arXiv:** 1304.3701 (2013)
7. P. Wagner, **V.V. Ivanovskaya**, B. Humbert, J.J. Adjizian, P.R. Briddon, C.P. Ewels. ”New stable hydrogenated graphene edge types: Klein edge and reconstructed Klein edge” arXiv 13067.3384 (2013)
8. **Я.В. Бакланова, Н.В. Таракина**, Л.Г. Максимова, **И.В. Бакланова**, Е.В. Поляков, **Т.А. Денисова**. “Кристаллические оксигидроксиды d-элементов IV группы: синтез, строение, физико-химические характеристики” // Сборник докладов Международной научно-практической конференции “Уральская горная школа – регионам”, г. Екатеринбург, 8-9 апреля 2013 г. с. 471-472.
9. О.И. Гырдасова, **И.В. Бакланова**, В.Н. Красильников, **Е.В. Шалаева**, М.А. Мелкозерова, Л.Ю. Булдакова. “Структурные, оптические и фотокаталитические характеристики высокодефектных 1-D оксидов цинка и титана (IV) активированных углеродом” // Сборник докладов Международной научно-практической конференции “Уральская горная школа – регионам”, г. Екатеринбург, 8-9 апреля 2013 г. с. 475-476.
10. **Еняшин А.Н.** “DFT моделирование литиевых интеркалятов сульфидов молибдена и ниобия” // Всероссийская молодёжная научная конференция “Иновации в материаловедении”, ИМЕТ РАН, Москва, 3-5 июня 2013 г., С. XXX.
11. М.Г. Зуев, А.А. Васин, Л.В. Викторов, **И.В. Бакланова, Е.В. Заболоцкая**. “Синтез и спектрально-люминесцентные характеристики поликристаллов со структурой оксиапатита, модифицированной фосфором” // 16-й Международный симпозиум “Порядок, беспорядок и свойства оксидов”, ODPO-16, Ростов-на-Дону, г. Туапсе, 7-12 сентября 2013г.: Труды симпозиума..- Ростов н/Д: Изд-во СКНЦ ВШ ЮФУ АПСН, 2013.-Выпуск 16 – Том – 1. - 244 с., С. 128-132.
12. В.Н. Красильников, **В.П. Жуков, Л.А. Переляева, И.В. Бакланова**, О.И. Гырдасова, **Е.В. Шалаева, И.Р. Шеин**. “Электронная зонная структура и оптическое поглощение допированного железом, кобальтом, медью оксида цинка с трубчатой морфологией агрегатов” // 16-й Международный симпозиум “Порядок, беспорядок и свойства оксидов”, ODPO-16, Ростов-на-Дону, г. Туапсе, 7-12 сентября 2013г.: Труды симпозиума..- Ростов н/Д: Изд-во СКНЦ ВШ ЮФУ АПСН, 2013.-Выпуск 16 – Том – 1. - 244 с., С. 218-221.
13. В.Н. Красильников, **И.В. Бакланова, Л.А. Переляева**, О.И. Гырдасова, Э.Г. Вовкотруб. “Синтез и люминесцентные свойства допированных европием формиата и оксида цинка” // 16-й Международный симпозиум “Порядок, беспорядок и свойства оксидов”, ODPO-16, Ростов-на-Дону, г. Туапсе, 7-12 сентября 2013г.: Труды симпозиума..- Ростов н/Д: Изд-во СКНЦ ВШ ЮФУ АПСН, 2013.-Выпуск 16 – Том – 1. - 244 с., С. 213-217.

14. В.Н. Красильников, **В.П. Жуков, Л.А. Переляева, И.В. Бакланова, И.Р. Шеин**. “Квантово-химические расчеты оптических характеристик и фотокаталитическая активность допированного железом диоксида титана” // 16-й Международный симпозиум “Упорядочение в минералах и сплавах”.–ОМА-16, Ростов-на-Дону, г. Туапсе, 12-17 сентября 2013г.: Труды симпозиума..- Ростов н/Д: Изд-во СКНЦ ВШ ЮФУ АПСН, 2013.-Выпуск 16 – Том – 1. - 232 с., С. 35-39.
15. **И.В. Бакланова**, В.Н. Красильников, **Л.А. Переляева**, Э.Г. Вовкотруб. “Эмиссионные характеристики наноразмерного диоксида титана, допированного лантаноидами (Sm и Eu)” // 16-й Международный симпозиум “Упорядочение в минералах и сплавах”.–ОМА-16, Ростов-на-Дону, г. Туапсе, 12-17 сентября 2013г.: Труды симпозиума..- Ростов н/Д: Изд-во СКНЦ ВШ ЮФУ АПСН, 2013.-Выпуск 16 – Том – 1. - 232 с., С. 31-34.
16. Н.А. Тарасова, **Н.А. Журавлев**, И.Е. Анимица, **Т.А. Денисова, Я.В. Бакланова**, В.Я. Кавун “Особенности локальной структуры гидратированных F⁻-замещенных твердых растворов на основе Ba₂In₂O₅” // Труды XVI Международного междисциплинарного симпозиума “Порядок, беспорядок и свойства оксидов”. ОДРО-16, г. Москва – г. Ростов-на-Дону – г. Туапсе, 7-12 сентября 2013г. Выпуск 16. Том 1. Изд-во Северо-Кавказского научного центра высшей школы ФГАОУ ВПО “Южный федеральный университет”. С. 112-116.
17. **Я.В. Бакланова, Н.А. Журавлев**, Л.Г. Максимова, **Т.А. Денисова, Н.В. Таракина** “Синтез и физико-химические свойства твердых растворов Li₂Me_xZr_{1-x}O_{3-d} (Me = Nb, Ti; x = 0.05, 0.1)” // Труды XVI Международного междисциплинарного симпозиума “Порядок, беспорядок и свойства оксидов”. ОДРО-16, г. Москва – г. Ростов-на-Дону – г. Туапсе, 7-12 сентября 2013г. Выпуск 16. Том 1. Изд-во Северо-Кавказского научного центра высшей школы ФГАОУ ВПО “Южный федеральный университет”. С. 117-120.
18. **Р.Д. Невмывако, Н.А. Журавлев**, Г.Д. Цыренова, Л.В. Балсанова, **Т.А. Денисова**, К.Н. Михалев, Э.Т. Павлова “ЯМР (MAS) ⁷Li в сложных молибдатах лития со структурой лионсита” // Труды XVI Международного междисциплинарного симпозиума “Упорядочение в минералах и сплавах”. ОМА-16, Ростов-на-Дону – г. Туапсе, 12-17 сентября 2013г. Выпуск 16. Том 1. Изд-во Северо-Кавказского научного центра высшей школы ФГАОУ ВПО “Южный федеральный университет”. С. 131-133.
19. **Р.Д. Невмывако, Н.А. Журавлев, Т.А. Денисова**, Ю.М. Кадырова, К.Н. Михалев, Е.Г. Хайкина, С.Ф. Солодовников “Ядерный магнитный резонанс в тройных молибдатах Li₂M₃Al(MoO₄)₄, M = Rb, Cs” // Труды XVI Международного междисциплинарного симпозиума “Упорядочение в минералах и сплавах”. ОМА-16, Ростов-на-Дону – г. Туапсе, 12-17 сентября 2013г. Выпуск 16. Том 1. Изд-во Северо-Кавказского научного центра высшей школы ФГАОУ ВПО “Южный федеральный университет”. С. 134-137.
20. **I.R. Shein, A.L. Ivanovskii**. “Electronic band structure, Fermi surface, structural and elastic properties of two polymorphs of MgFeSeO as possible new superconducting systems”// arXiv: 1310.3582 (2013)
21. **А.С. Ворох, И.И. Огородников, М.В. Кузнецов**. “Комплекс методов СТМ, РФД и фотоэлектронной голографии для идентификации структуры поверхностных слоев 1T-TiSe₂.” // 16-й международный симпозиум “Упорядочение в минералах и сплавах”, 12-17 сентября 2013, г. Ростов-на-Дону – Туапсе, Россия, Том. II, С.15-18
22. **И.И. Огородников, А.С. Ворох, М.В. Кузнецов**. “Фотоэлектронная дифракция и голограмма как методы изучения локальной атомной структуры поверхности твердых тел.” // 16-й международный симпозиум “Порядок, беспорядок и свойства оксидов.”, 7-12 сентября 2013, г. Ростов-на-Дону – Туапсе, Россия, Том I, С. 222-223.
23. Туленин С.С., Марков В.Ф., **Кузнецов М.В.** Исследование химически осажденных тонких пленок In₂S₃ // Сб. док. XXIII Всероссийской научной конференции “Проблемы теоретической и экспериментальной химии”– Екатеринбург, 23–26 апреля 2013. С.268–269.
24. М.Г. Зуев, С.Ю. Соковнин, В.Г. Ильвес, **И.В. Бакланова**. “Колебательные спектры микро- и наноплюминофоров Sr₂Y₈(SiO₄)₆O₂:(0.15)Eu” // Сборник материалов I Всероссийской научной Интернет-конференции с международным участием “Химическая наука: современные достижения и историческая перспектива”, г. Казань, 29 марта 2013 г. с. 78-81.

25. Виноградова Н.С., Щапова Ю.В., Вотяков С.Л., **Рыжков М.В., Ивановский А.Л.** “Электронное строение и проблема радиационной стойкости монацита” // В сб.: Труды ИГГ УрО РАН, вып. 160, с. 319-325 (2013)
26. **Д.В. Сутина, А.Л. Ивановский** “Электронная структура и химическая связь в нитриде Re_3ZnN по данным FLAPW-GGA расчетов”// Материалы конференции “Химическая наука: современные достижения и историческая перспектива. I Всероссийская научная Интернет-конференция с международным участием”. Казань, 29 марта 2013 г., с. 164-165.
- 27.

ТЕЗИСЫ

1. Oshtrakh M.I., Ushakov M.V., **Semenova A.S., Kellerman D.G.**, Йерельк V., Rodriguez A.F.R., Semionkin V.A., Morais P.C. Magnetite Nanoparticles As-Prepared and Dispersed in Copaiba Oil: Study Using Magnetic Measurements and M_össbauer Spectroscopy. 31st European Congress on Molecular Spectroscopy, Book of Abstracts. Cluj-Napoca, 2012, p. 62.
2. Oshtrakh M.I., Ushakov M.V., **Semenova A.S., Kellerman D.G.**, Йерельк V., Rodriguez A.F.R., Semionkin V.A., Morais P.C. Magnetite Nanoparticles As-Prepared and Dispersed in Copaiba Oil: Study Using Magnetic Measurements and M_össbauer Spectroscopy. 8th International Symposium on the Industrial Applications of the M_össbauer Effect. Programme and Abstracts. Dalian, 2012, p. 124.
3. Ushakov M.V., Oshtrakh M.I., **Semenova A.S., Kellerman D.G.**, Йерельк V., Rodriguez A.F.R., Semionkin V.A., Morais P.C. Comparative Study of Magnetite Nanoparticles As-Prepared and Dispersed in Copaiba Oil Using M_össbauer Spectroscopy and Magnetic Measurements. XII Международная конференция “Мессбауэровская спектроскопия и ее применения”, Сборник материалов – М: ИМЕТ РАН, 2012, с. 69.
4. Yadgarov I., Rosentsveig R., Tsverin Y., **Enyashin A.N.**, Leitus G., Cohen S.R., Popovitz-Biro R., Moshkovich A., Perfiliev V., Rapoport L., Vasic R., Frenkel A.I., Seifert G., Tenne R. “Controlled Doping of MS_2 ($M=\text{W}, \text{Mo}$) Nanotubes and Fullerene-like Nanoparticles” // 6-th COINAPO Topical Meeting Composites of Inorganic Nanotubes and Polymers “Nanocomposites of inorganic fullerenes/nanotubes, their characterization, properties & testing”, Rehovot, Israel, 19-21 November, 2012, P. 96
5. **Енишин А.Н.** “Мезоскопическая модель взаимодействия леннард-джонсовских атома и цилиндрической нанотрубки” // Всероссийская молодёжная научная школа “Химия и технология полимерных и композиционных материалов”, ИМЕТ РАН, Москва, 26-28 ноября 2012 г., С. 139.
6. Пахомова В.В., Глазырина П.Ю., (Устный - **Енишин А.Н.**) “Мезоскопическая модель нанотрубок, как ван-дер-ваальсово поле бесконечнопротяжённого цилиндра” // XIII научно-практическая конференция “Дни науки - 2013”, ОТИ НИЯУ МИФИ, г. Озёрск, 26-27 апреля 2013 г., Т.2, С. 35-37.
7. **Enyashin A.N.**, Bar-Sadan M., Houben L., Seifert G. “Line Defects within MoS_2 Layers” // The 47th Annual Scientific Meeting of Israel Society for Microscopy, Safed, Israel, 29-30 May 2013, P. 48.
8. Ghorbani-Asl M., **Enyashin A.N.**, Lorenz T., Kuc A., Heine T. “Modulation of electron transport in low-dimensional transition-metal dichalcogenides” // Book of Poster Abstracts for Conference “Flatlands Beyond Graphene”, Jacobs University Bremen, Bremen, Germany, 17-21 June, 2013, P. 17.
9. Houben L., **Enyashin A.N.**, Bar-Sadan M., Seifert G. “Line Defects in Molybdenum Disulfide Layers” // Book of Poster Abstracts for Conference “Flatlands Beyond Graphene”, Jacobs University Bremen, Bremen, Germany, 17-21 June, 2013, P. 40.
10. Seifert G., Erdogan E., **Enyashin A.N.** “Defects and edges in metal chalcogenide layers” // Book of Abstracts for Conference “Flatlands Beyond Graphene”, Jacobs University Bremen, Bremen, Germany, 17-21 June, 2013, P. 90.
11. (Стендовый - **Enyashin A.N.**), **Ivanovskii A.L.** “Density-Functional Study of Targeted Intercalation of Sulfide Multilayers” // Book of Poster Abstracts for Conference “Flatlands Beyond Graphene”, Jacobs University Bremen, Bremen, Germany, 17-21 June, 2013, P. 4-5.
12. **Енишин А.Н.** “Квантово-химическое изучение направленной интеркаляции слоистых сульфидов” // X Российская ежегодная конференция молодых научных сотрудников и аспирантов “Физико-химия и технология неорганических материалов”, ИМЕТ РАН, Москва, 22-25 октября 2013 г., С. 86.

13. **Енишин А.Н.** “Квантово-химическое изучение механической устойчивости отдельных фуллереноподобных MoS₂ частиц” // V Международная конференция “Деформация и разрушение материалов и наноматериалов DFMN2013”, ИМЕТ РАН, Москва, 26-29 ноября 2013 г., С. 828-829.
14. **Enyashin A.N., I.R.Shein, A.L. Ivanovskii.** “The influence of the atomic vacancies on the electronic and magnetic properties of new graphyne allotropes as obtained from first-principles calculations”// In: The international Summer School Nanotechnology: From Fundamental Research to Innovations and Interat. Res. and conference NANO-2013” 25 August-1 Sept. 2013, Bukovel, Ukraine, Book of Abstracts, P. 116.
15. М.Г. Зуев, А.А. Васин, В.Г. Ильвес, С.Ю. Соковнин, **И.В. Бакланова**. “Оптические центры в нанофосфоре Sr₂Gd₈(SiO₄)₆O₂:Eu” // Тезисы доклада Российской конференции (с международным участием) “Высокотемпературная химия оксидных наносистем”, г. Санкт-Петербург, 7–9 октября 2013 г., с. 35.
16. Teterin Yu.A., Maslakov K.I., **Ryzhkov M.V.** Teterin A.Yu., Ivanov K.E., Petrov V.G., Enina D.A., Kalmykov S.N. “XPS investigation of PuO₂” // The First Russian-Nordic Symposium on Radiochemistry “RNSR-2013”: Abstracts, 21-24 October 2013, Moscow, Russia: IDEA PRINT, 2013 – 200 p. P.30.
17. Teterin Yu.A., Maslakov K.I., **Ryzhkov M.V.** Teterin A.Yu., Ivanov K.E., Petrov V.G., Enina D.A., Kalmykov S.N. “XPS structure study of NpO₂” // The First Russian-Nordic Symposium on Radiochemistry “RNSR-2013”: Abstracts, 21-24 October 2013, Moscow, Russia: IDEA PRINT, 2013 – 200 p. P.31.
18. Mirmelstein A.V., **Ryzhkov M.V.**, Yu S.-W., Chung B.W., Tobin J.G. “Ab initio cluster calculations of electronic structure of actinide systems” // XIII Международный семинар “Фундаментальные свойства плутония” 09-13 сентября 2013, Саров, Россия: Тезисы докладов, с.55.
19. **T.A.Denisova**, L.G.Maksimova, **Ya.V.Baklanova**. “Syntesis and physico-chemical properties of solid solutions Li₂TixZr_{1-x} (x = 0.05 – 0.1) and related oxyhydroxides” // Abstract book. Summer school. International research and practice conference: Nanotechnology and nanomaterials (NANO-2013). 25 August – 1 September 2013. Bukovel, Ukraine. P.212.
18. **А.С.Семенова**, Н.А.Мухина, В.С.Горшков, Ю.Г.Чукалкин, **Д.Г.Келлерман**. Особенности магнитных свойств фосфатов LiMPO₄ (M- Mn, Co, Ni). Материалы докладов VIII Всероссийской конференции “Керамика и композиционные материалы” Сыктывкар 17-20 июня 2013, стр.11
19. **А.С.Семенова**, О.В.Меркулов, **Д.Г.Келлерман**, А.А.Марков. Термоэлектрические свойства двойного литий-натриевого кобальтита LixNayCoO₂. Материалы докладов VIII Всероссийской конференции “Керамика и композиционные материалы” Сыктывкар 17-20 июня 2013, стр.78.
20. **E.V. Shalaeva**, O.I. Gyrdasova, M.A. Melkozerova, V.N. Krasilnikov, Morphology and structure of photoactive quasi-one-dimansional Zn(Me)O@: effect of doping and synthesis conditions // Abstract book “International research and practical conference: Nanotechnology and nanomaterials (NANO-2013)” 25 August-1September 1023, Bukovel, Ukraine, Institute of Physics of NAS Ukraine, 2013, p.157.
21. **E. Shalaeva**, Yu. Chernyshev, E. Smirnova and S.V. Smirnov, Lamellar structure and nanomechanical properties of quasicrystalline alloys Al-Cu-Fe // Book of abstracts “ 12th International conference on quasicrystals, ICQ 12“, 1-6 september 2013, Cracow, Poland, Cracow, 2013, P-60.
22. **E. Shalaeva**, A. Prekul and N. Schegolikhina, Curie temperature and density of the states at the Fermi level for the Al-Cu-Fe phases: β-solid solution – approximants-icosahedral quasicrystals // Book of abstracts “ 12th International conference on quasicrystals, ICQ 12“, 1-6 september 2013, Cracow, Poland, Cracow, 2013, P-60.
23. **Шалаева Е.В.**, Мурзакаев А.М., Щапова Ю.В., Вотяков С.Л., Эффекты наноразмерного текстурирования в природных цирконах // Доклады V Всероссийской молодежной научной конференции “Минералы: строение, свойства, методы исследования”, 14-17 октября 2013, Екатеринбург, Институт геологии и геохимии УрО РАН, 2013, с.217.

24. M.V. Patrakeev, A.A. Markov, E.V. **Shalaeva, E.V.** Tsipis, V.V. Kharton, J.C. Waerenborgh, I.A. Leonidov, V.L. Kozhevnikov // "Phase separation-promoted ion conduction in SrFe_{0.67}Ta_{0.33}O_{3-δ}"// The 19th International Conference on Solid State Ionics. Kyoto, Japan, June 2-7, 2013. Book of Abstract, Thu-B2-10.
25. K.Yu. Chesnokov, A.A. Markov, M.V. Patrakeev, I.A. Leonidov, V.V. Kharton, A.M. Murzakaev, **E.V. Shalaeva**, V.L. Kozhevnikov. Structure, Non-Stoichiometry and Transport properties of La_{0.5}Sr_{0.5-x}Ca_xO_{3-δ} oxides. The 19th International Conference on Solid State Ionics. Kyoto, Japan, June 2-7, 2013. Book of Abstracts, Thu-E-021.